

охлаждении и нагреве в интервале температур от -150° до 150°C со скоростью $20^{\circ}\text{C}/\text{мин}$. Температуры превращений определяли методом касательных (стандарт ASTM 2004 - 05), энергию превращений определяли по площади под калориметрическим пиком ДСК.

Механические испытания на растяжение малых плоских образцов с рабочей частью $1*0,25*4$ мм проводились при комнатной температуре со скоростью деформации $1*10^{-3}$ с-1 на специальной установке конструкции ИФПМ УГАТУ и установке Shimadzu AG-50kNXD в лаборатории механики перспективных массивных наноматериалов СПбГУ. Оценочное реактивное напряжение (σ_r) определялось по известной формуле $\sigma_r = \sigma_t - \sigma_m$, где σ_t – предел текучести, σ_m – предел фазовой текучести, а обратимая деформация ($\epsilon_{\text{ПУ}}$) оценивалась по длине площадки фазовой текучести.

Показано, что, как и в крупнозернистых (КЗ) сплавах, в ультрамелкозернистых (УМЗ) и нанокристаллических (НК) сплавах TiNi происходят последовательные изменения структуры и свойств, вызванные фазовым наклепом, при увеличении количества термоциклов вплоть до $n=100$ с быстрым нагревом и быстрым охлаждением до -196°C . Показано, что при термоциклировании КЗ и УМЗ сплавов Ti50Ni50 по выбранным режимам направление изменения температур мартенситных превращений меняется в процессе термоциклирования - с нарастанием числа термоциклов сначала наблюдается снижение температур а затем их рост. Температуры превращений в ультрамелкозернистом состоянии в сплаве Ti49,15Ni50,85 в целом более стабильны к термоциклированию, чем в КЗ. Также продемонстрировано, что упрочнение, вызванное фазовым наклепом, в УМЗ состояниях исследованных сплавов TiNi происходит несколько более интенсивно, чем в КЗ.

Список публикаций:

- [7] В.Н. Хачин, *Никелид титана: структура и свойства*, Москва, Наука, Россия 1992, 161 с.
- [8] V. Brailovski, S. Prokoshkin, P. Terriault, F. Trochu, *Shape memory alloys: fundamentals, modeling, applications*, Montreal, Ecole de technologie superieure (ETS) Publ. Canada 2003, 851 p.
- [9] K. Otsuka, *Shape Memory Materials* (Eds: K. Otsuka, C.M. Wayman), Cambridge, Cambridge University Press, UK 1999, 284 p.
- [10] В.Э. Гюнтер, *Медицинские материалы и имплантаты с памятью формы* (Eds: В.Э. Гюнтер, Г.Ц. Дамбаев, П.Г. Сысолятин), Томск, ТГУ, Россия 1998, 487 с.

Поиск новых стабильных монокристаллических аллотропных форм углерода методом USPEX

Шаязdanов Айгиз Рашитович

Бакирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы

Набиуллин Ильсур Рашитович к.ф.-м.н.

aigizshayazdanov33@gmail.com

Углерод – уникальный химический элемент, существующий в различных аллотропных модификациях, проявляющих разные химические и физические свойства благодаря способности образовывать структуры с различным типом гибридизации химических связей (sp -, sp^2 -, и sp^3). На сегодняшний момент кристаллические формы углерода включают в себя графит, алмаз, гексагональный алмаз (лонсдейлит), нанотрубки, фуллерены и даже атомные цепочки (карбины) с кардинально отличающимися друг от друга свойствами.

Среди монокристаллических материалов самым твёрдым материалом является кубическая фаза алмаза, в то время как графит является наименее твёрдым материалом в силу своей слоистой природы. Изучение механизма превращения одной формы углерода в другую, поиск углеродных структур с уникальными электронными, механическими и упругими свойствами, являются предметом исследования экспериментальных и теоретических работ. Особый интерес уделяется поиску новых сверхтвёрдых материалов с высокими значениями твердости и объёмного модуля, сопоставимыми с алмазом. Известно, что графит переходит в кубический или гексагональный алмаз при высоком давлении (> 15 ГПа) и температуре (> 1300 К). Сжатый графит выступает в качестве исходного материала при переходе в различные сверхтвёрдые фазы.

Целью данной научной работы является получение алмазоподобных структур близких по свойству к алмазу. За счет своих уникальных механических свойств, сверхтвёрдые материалы всегда играли важную роль в различных отраслях.

Компьютерный дизайн материалов – это новая, революционная область в науке. Вместо того, что бы полагаться на экспериментальные методы проб и ошибок или же на случай – а большинство материалов до настоящего момента были найдены именно этими способами – теперь можно открывать новые материалы на компьютере, задавая направление для экспериментальных работ.

Кристаллическая структура вещества является наиболее важным носителем информации о материале – зная структуру, можно предсказать широкий набор его свойств. Эволюционный алгоритм USPEX является одним из самых эффективных методов для предсказания различных структур.

Эволюционный алгоритм USPEX включает локальную оптимизацию и рассматривает структурные переменные, как физические числа, вместо не интуитивного двоичного кода. Другие важные соображения заключаются в следующем:

Алгоритм отбирает структуры (потомства), которые имеют сходство с более успешными из ранее отобранных структур, что осуществляется путем выбора низкоэнергетических структур, которые станут родителями нового поколения. Действуя на низкоэнергетические структуры, операторы вариации с высокой вероятностью приводят к появлению других низкоэнергетических структур. В методе USPEX используются четыре вариационных оператора:

1) наследственность; 2) решеточная мутация; 3) перестановка; 4) специальные координатные мутации

В своей работе я искал новые стабильные монокристаллические аллотропные формы углерода, механически действуя на углерод, т.е. задавая критические условия изменяя Р и Т. И в этих критических условиях проводилась оптимизация кристалла по энергии и по твердости. Были получены две стабильные кристаллические углеродные структуры. Предсказание кристаллических структур было проведено двумя разными способами: в первом расчете было проведено прогнозирование кристаллической структуры, используя комбинацию USPEX с кодом LAMMPS. В этом простом расчете в одной элементарной ячейке взял 8 атомов углерода и потенциал Терсоффа.

Второй прогноз кристаллической структуры углерода проводился с 8 атомами на элементарную ячейку при 10 ГПа с использованием кода CASTEP, основанный на DFT.

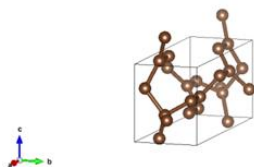


рис. 1. Лучшая структура полученная методом LAMMPS.

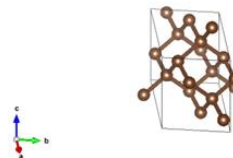


рис. 2. Лучшая структура полученная методом DFT

По полученным двум стабильным структурам, можно сделать заключение, что полученные структуры не похожи на кристаллическую структуру алмаза, что и не удивительно, так как приложенное давление и заданная температура недостаточны для получения алмазоподобной структуры. Но сравнивая две полученные структуры, можно увидеть что расчет вторым методом больше похож по структуре на алмаз. И можно сделать предположение, что можно получить алмазоподобную структуру при помощи второго метода, если увеличить давление и температуру. Поэтому в дальнейшем для получения алмазоподобной кристаллической решетки и подбора оптимальных параметров будем проводить моделирование с увеличением давления и температуры с использованием кода CASTEP, основанного на DFT.

Список публикаций:

- [1] Оганов А. Р., *Совр. методы прогнозирования кристаллической структуры* А. Р. Оганов/ Wiley-VCH, 2010. – 274 с.
- [2] Оганов А. Р., *Прогнозирование кристаллической структуры с использованием ab initio эволюционной техники: принципы и приложения* /Журнал«Химическая физика» [Текст]/А.Р.Оганов,С. В.Гласс. 2006. Том. 124.№ 24.Тема 47. Док. 04
- [3] Оганов А. Р., *Как работает эволюционное прогнозирование кристаллической структуры - и почему* / Отчеты о химических исследованиях [Текст]/ А. Р. Оганов, А. О. Ляхов, М. Валле. 2011. Том. 44. № 3. С. 227—237.

Исследование микроструктуры и прочности сварного соединения Ni-Ni, полученного ультразвуковой сваркой

Шаяхметова Эльвина Рафитовна

Самигуллина Асия Айратовна, Жияев Александр Петрович, Назаров Айрат Ахметович
Уфимский государственный авиационный технический университет

Жияев Александр Петрович
elvina1408@yandex.ru

Ультразвуковая сварка (УЗС) является одним из эффективных методов соединения металлов. Этот вид сварки основан на использовании энергии механических колебаний, генерируемых в материалах с помощью сварочного инструмента колебательной системы, который выполняет возвратно-поступательные движения с ультразвуковой частотой (19-25 Гц) [1,2]. Высокочастотные колебания, возбуждаемые в соединяемых листовых материалах под статическим давлением, вызывают трение их поверхностей друг о друга, пластическую деформацию материалов и нагрев в области сварки. Температура во время сварки ниже, чем температура плавления металла, поэтому УЗС – это метод твердофазного соединения. Образование соединения при УЗС